

TECHNICKÁ UNIVERZITA V LIBERCI

Fakulta mechatroniky a mezioborových inženýrských studií

Studijní program: B 2612 – Elektrotechnika a informatika

Studijní obor: 2612R011 – Elektronické informační a řídicí systémy

Vývoj a ověření modelu proudění s nehomogenní hustotou v puklinovém prostředí

Development and verification of model variable density flow in fractured media

.....

Bakalářská práce

Autor: **Filip Šír**

Vedoucí bakalářské práce: Ing. Milan Hokr, Ph.D.

Konzultant: Ing. Otto Severýn, Ph.D.

V Liberci 16.5.2007

Prohlášení

Byl jsem seznámen s tím, že na mou bakalářskou práci se plně vztahuje zákon č. 121/2000 o právu autorském, zejména § 60 (školní dílo).

Beru na vědomí, že TUL má právo na uzavření licenční smlouvy o užití mé BP a prohlašuji, že **s o u h l a s í m** s případným užitím mé bakalářské práce (prodej, zapůjčení apod.).

Jsem si vědom toho, že užít své bakalářské práce či poskytnout licenci k jejímu využití mohu jen se souhlasem TUL, která má právo ode mne požadovat přiměřený příspěvek na úhradu nákladů, vynaložených univerzitou na vytvoření díla (až do jejich skutečné výše).

Bakalářskou práci jsem vypracoval samostatně s použitím uvedené literatury a na základě konzultací s vedoucím bakalářské práce a konzultantem.

V Liberci 16.5.2007

Poděkování

Chtěl bych poděkovat vedoucímu bakalářské práce panu Ing. Milanu Hokrovi, Ph.D. za poskytnutý čas, informace a důležité rady, které mi udělil v průběhu naší spolupráce.

Abstrakt

Tato bakalářská práce je zaměřena na výpočet úloh podzemního proudění s nehomogenní hustotou. Problematika zde řešená je v kontextu s konstrukcí úložišť jaderného odpadu a možného průběhu kontaminace v případě havárie, nebo průběhu znečištění podzemních vod. Další oblast použití je v modelování podzemního proudění v přímořských oblastech, kde dochází k ovlivnění proudění slanou mořskou vodou.

V úvodu je charakterizována fyzikální podstata podzemního proudění, jeho zjednodušení, ovlivnění hustotou a změnou proudění v okolí a uvnitř pukliny. V následující části je popsán matematický model a zároveň software použitý na vlastní modelování. Byla doplněna nová vlastnost ovlivňující proudění, hustota. Její vliv na proudění je demonstrován na testovacích úlohách.

Abstract

This bachelor diploma is focused on calculation problems of variable density of groundwater flow, concerning problems of construction deep geological repository of radioactive waste and possible contamination in case of accident, or groundwater pollution. Another area of usage is modelling underground flow in seaside areas, where the flow is being affected by seawater.

In the introduction is characterized physical matter of underground flow, its simplification, affection by density and change in flow in a rift and its surroundings. In the next part of work is described mathematical model and software used for modelling. New attribute affecting flow was added, the density. Its effect on flow is demonstrated on excersisses.

Osnova

1	Úvod do problému	8
2	Fyzikální popis prostředí	10
2.1	Fyzikální rovnice proudění	11
2.2	Vliv hustoty na proudění	12
2.2.1	Hustota ze zvolené koncentrace	13
2.2.2	Hustota ze všech koncentrací	13
2.2.3	Hustota z tabulky, nebo obecné funkce	14
2.3	Vliv puklin na proudění	14
2.4	Aproximace prostředí	16
3	Stávající program 123Flow	17
3.1	Spuštění programu	17
3.1.1	Původní řídicí ini soubor	17
3.1.2	Vstupní datové soubory	19
4	Upravený program 123Flow	20
4.1	Nové vlastnosti a parametry	20
4.2	Úpravy funkcí v programu	22
4.3	Nový řídicí ini soubor	22
4.4	Výstupy programu	22
4.4.1	Proudové pole rychlostí	23
4.4.2	Transport látky	23
5	Testovací úlohy	24
5.1	Deska 4x3 m bez pukliny	24
5.1.1	Bez toku	25
5.1.2	S tokem	28
5.2	Deska 10x10 m s puklinou na diagonále	32
5.2.1	Bez toku	33
5.2.2	S tokem	35
6	Závěr	39

1 Úvod do problému

Problematika podzemního proudění je obecně velmi složitá. Jelikož nejsme schopni podzemní proudění přímo sledovat, je potřebné tyto děje modelovat. Protože však nejsme schopni tyto děje sledovat, je i modelování těchto dějů velmi složité. Lze to na základě fyzikálních rovnic popisujících proudění a z údajů pro konkrétní modelovanou oblast. Protože matematický model podzemní oblasti, i velmi malé, by byl velmi složitý, je nutné dané modely zjednodušit. Zjednodušení však přinese negativní ovlivnění přesnosti. Je nutné ošetřit, aby toto ovlivnění nebylo nijak razantní.

Podzemní proudění v závislosti na hustotě transportovaných látek je oproti proudění bez vlivu hustoty, v matematickém měřítku, značně složitější úloha. Vzniklá úloha je totiž sdružená. Problematika tohoto proudění je zvláště důležitá při stavbě dolů, a jejich negativní ovlivnění tímto prouděním. Je však také použitelná při stavbě hlubinných úložišť jaderného odpadu, či jinak ekologicky závadných materiálů. V případě havárie je nutné modelovat průběh kontaminace podzemního prostředí. Reálné je i modelování proudění povrchové vody, a jejího případného znečištění.

Všechny tyto typy úloh je možné modelovat v rámci krátkého časového rámce, ale i v řádu několika let.

Reálné horninové prostředí je možné nahradit několika zjednodušujícími strukturami:

- 1) Porézní prostředí s vlastnostmi odpovídajícími puklinovému
- 2) Model se dvěma typy porézního prostředí - dvojí porozitou
- 3) Diskrétní puklinová síť

Popíšeme zde první a třetí variantu, jejich kombinaci:

Popis pomocí 1D, 2D a 3D konečných prvků. Je to tedy kombinace porézního prostředí s vlastnostmi odpovídajícími puklinovému a diskrétní puklinové síti. Tu využijeme k popisu hlavních puklin. Jejich těsné okolí, které je vlastně rovněž tvořeno puklinami, ale výrazně menších rozměrů, reprezentujeme jako porézní prostředí s parametry zprůměrovanými přes vhodný reprezentativní elementární objem (REV).

Úkolem této práce je začlenit do výpočtu proudění vody, závislost na hustotě transportovaných látek ve stávajícím programu, který počítá proudění a konvektivní složku transportu ve struktuře 1D, 2D, 3D konečných prvků.

Dalším úkolem je poté rozsah možného použití na modelových testovacích úlohách. Je zde také porovnáno proudění s vlivem a bez vlivu hustoty transportovaných látek. Testovací úlohy zde popsány jsou dvě: deska 5x4 body s 24 trojúhelníkovými elementy a deska s 200 elementy a puklinou na diagonále.



Obrázek 1: Hornina – nehomogenní porézní prostředí bez výrazných puklin

2 Popis prostředí

Horninové prostředí je tvořeno základní horninovou matricí, která je v obecných směrech propukána puklinami s obecnými rozměry. Tato matrice obsahuje velmi malé množství pórů, vezmeme – li v úvahu objem celé referenční oblasti. Z toho vyplývá, že referenční oblast je schopna do sebe pojmout malé množství kapaliny. Touto kapalinou se poté může pomalu šířit látka, která je v kapalině obsažena.

V horninovém prostředí je možno sledovat dva typy puklin, které ovlivňují proudění kapaliny. Jsou to pukliny rovnoběžné, které se vyskytují ve vrstevnatých horninách, a pukliny nahodilé, ty se vyskytují v horninách bez preference směrů.

Oba typy puklin je také možno rozdělit podle toho, zda u nich převládá akumulace, či vedení kapaliny. Velké pukliny budou zajišťovat vedení kapaliny, zatímco malé a slepé pukliny budou kapalinu akumulovat.



Obrázek 2: Puklinová struktura v hornině

2 Fyzikální popis prostředí

Horninové prostředí, které je plně zaplněno kapalinou (je tedy vyplněno 100 % objemu) nazýváme saturované. I v tomto prostředí lze sledovat proudění vody s rozpuštěnými látkami o určité koncentraci. Sledujeme-li proudění vody s rozpuštěnými substancemi, dochází také k transportu těchto substancí. Při proudění vody můžeme uvažovat o třech základních transportních mechanismech. Jsou jimi konvekce, hydrodynamická disperze a nerovnovážná interakce.

Při konvekci dochází k transportu substance díky pohybu celého roztoku. Tento pohyb je možné vyvolat vtokem a výtokem ve zvolených elementech modelované oblasti, nebo také různými tlaky v těchto elementech.

Nerovnovážná interakce představuje vlastnost horniny zvanou dvojí porozita. Tato vlastnost působí retardaci šíření substance horninovým prostředím.

V hydrodynamické disperzi dochází k transportu substance vlivem gradientu míst s vyšší koncentrací do míst s nižší koncentrací. Nevytváří se tedy proudové pole, ale k transportu přesto dochází. Koncentrace se „rozmíchává“ do okolí.

2.1 Fyzikální rovnice proudění

V saturovaném prostředí se nachází substance o určité koncentraci. Koncentrace této substance závisí na čase a souřadnicích v prostoru.

$$c(x,t) \text{ [g/m}^3\text{]}$$

V tomto plně saturovaném prostředí lze proudění kapaliny popsat pohybovou rovnicí a rovnicí bilance hmoty. Pohyb kapaliny vyjadřuje Darcyho zákon:

$$\mathbf{u} = -\mathbf{K} \nabla \Phi$$

\mathbf{u} vektor Darcyovské rychlosti

$\nabla \Phi$ gradient piezometrické výšky

\mathbf{K} hydraulická vodivost

Tento zákon je však pouze empiricky zjištěný a přesně platí pouze pro „dokonalé“ materiály. Konstanta \mathbf{K} je závislá na druhu materiálu. Pro izotropní materiál je skalár a pro anizotropní materiál je ve formě tenzoru, pro tento případ nemusí být vektory toku a gradientu rovnoběžné.

Druhou rovnicí popisující proudění je rovnice bilance. Tato rovnice se dá považovat za základní rovnici ve fyzice. Vyjadřuje vlastně zákon zachování energie, neboť popisuje lokální rozdíly toků v rovnováze se zdroji.

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = \mathbf{f}$$

\mathbf{f} ... hustota zdrojů

\mathbf{u} ... vektor Darcyovské rychlosti

Uvedená rovnice bilance popisuje skutečnost, že co do elementu vteče, musí také vytéct. Zde popsané rovnice popisují proudění, které není ovlivněno koncentracemi transportovaných látek.

2.2 Vliv hustoty na proudění

Rovnice popsané v kapitole 2.1 se po zahrnutí vlivu hustoty změni. V rovnici bilance zahrnut další člen, kterým se vyjádří změna hustoty v závislosti na stlačení daného modelového objemu. Rovnice bilance vypadá po úpravě takto:

$$\chi \frac{\partial \Phi}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{u} = \mathbf{f}$$

Jelikož je však tato změna hustoty minimální, oproti hustotě závislé na koncentraci, tak tento efekt zanedbáme. Hlavní změna pro výpočet proudění je tedy provedena v Darcyho zákoně. Modifikovaný Darcyho zákon, ve kterém je zahrnut nový člen, jenž vyjadřuje vliv hustoty vypadá takto:

$$\mathbf{u} = -\mathbf{K} \nabla \left(\Phi + \frac{\rho - \rho_0}{\rho_0} z \right)$$

ρ ... hustota spočtená pro dané místo a čas

ρ_0 ... hustota kapaliny

z ... hodnota z -ové souřadnice

Ve vzorci je obsažena proměnná ρ , která vyjadřuje hustotu spočtenou z koncentrace transportované substance. Jelikož v proudící kapalině může být obsaženo více substancí, je nutné stanovit postup, jak z těchto koncentrací jednotlivých substancí výslednou hodnotu hustoty spočítat. Tento problém je diskutován v kapitole 2.2.2.

2.2.1 Hustota ze zvolené koncentrace

Je základní a nejjednodušší variantou výpočtu hustoty. Je založena na principu transportu pouze jedné látky, nebo pokud je transportovaných látek, na výběru jedné z nich. Z hodnot koncentrací této látky se posléze hustota spočítá.

$$\rho(c) = \rho_0 + c$$

ρ_0 ... počáteční hustota

c ... hodnota koncentrace

Výsledná hustota je tedy součet koncentrace látky a počáteční hustoty v daném místě a čase. Nelze tedy zahrnout vliv dalších transportovaných látek na výslednou hodnotu hustoty. Tato varianta vytváří lineární závislost hustoty. Ve skutečnosti je tato závislost ve většině případů nelineární, ale je možný výskyt i lineárního průběhu avšak s menším sklonem, než jaký by měla křivka z uvedeného vzorce.

2.2.2 Hustota ze všech koncentrací

Upravíme-li vzorec z kapitoly 2.2.1, je možné zahrnout vliv všech transportovaných látek. Tento princip vychází z toho, že ke každé transportované látce přiřadíme α_i , které vyjadřuje váhu této transportované látky.

$$\rho(c) = \rho_0 + \sum_{i=0}^n \alpha_i c_i$$

ρ_0 ... počáteční hustota

c_i ... hodnota koncentrace i -té substance

α_i ... hodnota váhy i -té substance

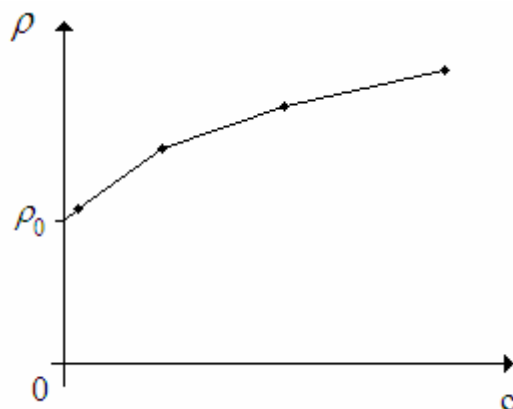
n ... počet substancí

Jelikož je tento vzorec poměrně jednoduchý, byl aplikován pro výpočet hustoty. Výhodou je právě možnost volby váhy koncentrací jednotlivých transportovaných látek. Koeficient α zahrnuje fakt, že při měřeních vzrůstá hodnota hustoty pomaleji, než jako při prostém součtu. Hodnota α se může pohybovat v rozmezí 0 a 1.

2.2.3 Hustota z tabulky, nebo obecné funkce

Poslední možností výpočtu hustoty z koncentrace je postup, kdy máme pro jednotlivé koncentrace stanovenou hustotu v tabulce. Tento postup umožňuje značnou variabilitu, je však náročný a použitelný pouze pro omezenou oblast koncentrací. Tabulka by jinak musela obsahovat značné množství hodnot. Také je potřeba tabulku upravovat pro každou modelovou úlohu.

Poslední možností výpočtu hustoty je zvolená obecná funkce. U této metody je však problém s definováním takové funkce, která by musela reflektovat vlastnosti modelované úlohy. Sestavení takové funkce je možné složením základních funkcí (lineární, exponenciální, ...). Ovšem vytvořit takto námi požadovanou funkci by bylo velmi náročné, a tak je možné použití proložené funkce zvolenými body, viz obr. 3.

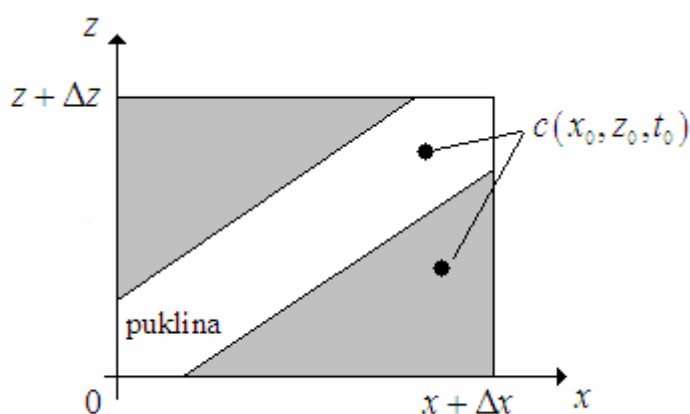


Obrázek 3: Obecná funkce pro výpočet hustoty $\rho = f(c)$.

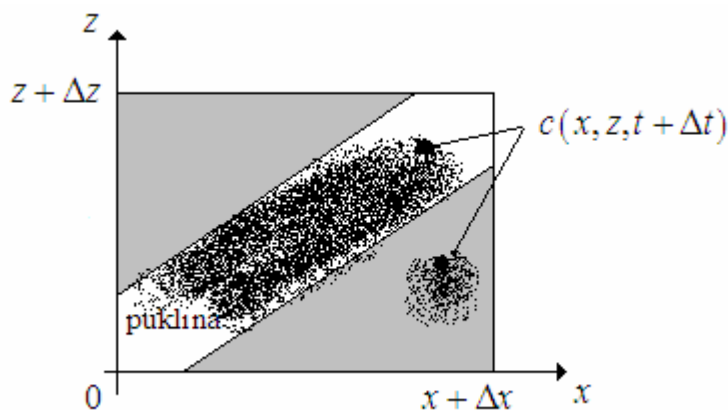
2.3 Vliv puklin na proudění

Puklinu můžeme popsat jako objekt o obecných rozměrech, jenž zabírá obecnou oblast ve směrech souřadných os. Jak již bylo uvedeno v kapitole 2, existují

dva typy puklin: malé, slepé pukliny a velké pukliny. Je-li ve vybrané matici modelovaného prostředí velká puklina a do této pukliny vložíme substanci s vyšší koncentrací, než je v okolí, bude se substance šířit právě touto puklinou, neboť ta jí klade menší odpor, než okolí. Právě z tohoto důvodu pukliny velmi ovlivňují proudění vody a následný transport v ní rozpuštěné substance. V oblasti s většími puklinami dojde k rozšíření substance nepoměrně rychleji než v oblasti s malými a slepými puklinami.



Obrázek 4: Obecná oblast s puklinou a počáteční koncentrací v čase 0 s.

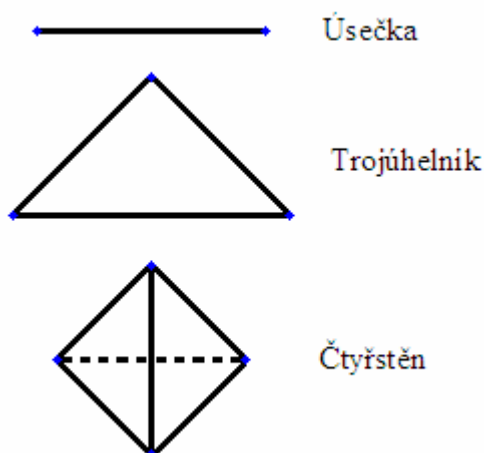


Obrázek 5: Obecná oblast v čase $t + \Delta t$.

Jev, jenž je obecně zobrazen na obrázcích 4,5, kdy transport substance v puklině, probíhá mnohonásobně rychleji, než v okolí mimo puklinu, je demonstrován v testovacích úlohách, konkrétně v úloze o rozměrech 10x10 metrů s puklinou.

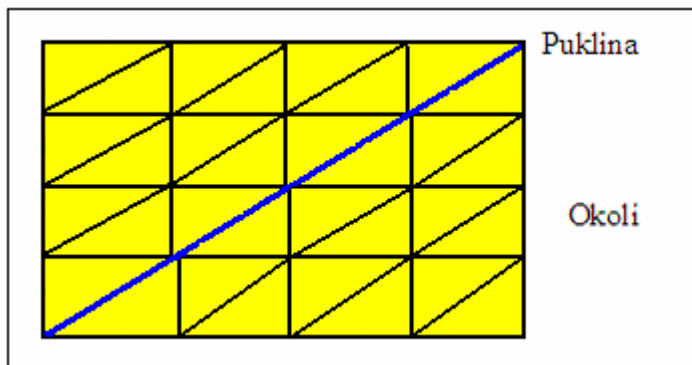
2.4 Aproximace prostředí

Zvolená aproximace prostředí je pomocí diskrétní puklinové sítě a porézního prostředí. To znamená, že velké pukliny vyjádříme konečnými prvky odpovídající dimenze s velkou hydraulickou vodivostí. Okolní prostředí s malými a slepými puklinami nahradíme porézním prostředím s malou hydraulickou vodivostí. Prostředí je aproximováno pomocí elementů, které jsou zobrazeny na obrázku 6.



Obrázek 6: Aproximační elementy

Z těchto elementů je sestavena celá modelovaná oblast. Oblast s puklinou lze aproximovat tak, že puklina je tvořena 2D elementy a okolí 3D elementy. Avšak z výpočetního hlediska je možné tutéž úlohu aproximovat tak, že puklina je tvořena 1D elementy a okolí 2D elementy, což představuje svislý řez. Jak může aproximovaná oblast vypadat, je zobrazeno na obrázku 7. V tomto obrázku je zahrnuta puklina vytvořená z 2D elementů a její okolí je stvořeno ze 3D elementů.



Obrázek 7: Řez 3D oblastí s puklinou

V elementech přiléhajících k puklině dochází ke stejným dějům jako v puklině samotné, avšak vlivem malé hydraulické vodivosti je zde malá rychlost.

3 Původní program 123flow

Původní program 123flow byl vytvořen pro výpočet proudění a následně transportu látky v horninovém prostředí. Tento program diskredituje modelovanou oblast pomocí 3D, 2D, 1D elementů, je diskutováno ve 2.4. Dále spočítá proudění pro každou transportovanou substanci zvlášť. Z výsledného proudového pole poté spočítá transport jednotlivých látek rozpuštěných ve vodě.

Vstupem do tohoto programu je sedm datových souborů, které specifikují prostředí a okrajové podmínky modelové oblasti, která je programem počítána. Dále pak řídicí soubor, jenž definuje základní výpočetní a výstupní parametry programu.

3.1 Spuštění programu

Program je spuštěn souborem flow123d.exe, názvem řídicího souboru a určujícím parametrem. Tento parametr určuje, zdali se jedná o transformaci vstupních dat, nebo o vlastní výpočet pomocí metody konečných prvků s ustáleným a neustáleným prouděním.

3.1.1 Řídicí ini soubor

Tento soubor je určující pro vlastní výpočet. Je v něm uveden název úlohy, začátek a konec výpočtu, jednotlivé parametry výpočtu, výstupní parametry a odkazy na jednotlivé datové soubory.

Řídicí ini soubor je rozdělen do několika částí

- Global (je zde uveden název úlohy, začátek a konec simulace)
- Input (vstupní datové soubory pro síť, materiál, okrajové podmínky a sousedící elementy)
- Run (uložení informací z průběhu výpočtu a stupeň množství vypsaných informací při běhu výpočtu)
- Solver (zvolený typ řešiče a jeho přesnost)
- Output (zvolené typy výstupních parametrů a výstupních souborů)

- Transport (výpočet transportu, vstupní datové soubory pro koncentraci, okrajové podmínky transportu, výstupní soubor transportu)
- Constants (fyzikální konstanty)

Příklad řídicího ini souboru pro modelovou úlohu s 24 elementy:

```
[Global]
Problem_type =1
Description =Test - Deska s 24 elementy
stop_time    =100
save_step     =0.1

[Input]
File_type     =1
Mesh          =deska.msh
Material      =deska.mtr
Boundary      =deska.bcd
Neighbouring  =deska.ngh

[Run]
Log_file      =deska.log
Screen_verbosity =7
Log_verbosity  =7
Pause_after_run =Yes

[Solver]
Keep_solver_files =Yes
Manual_solver_run =No
Use_control_file  =No
Control_file      =pokus.in
Solver_accuracy   =1e-7
Solver_name       =matlab
```



```

[Output]
Write_output_file      =Yes
Output_file            =results.pos
Output_digits          =12
Output_file_type       =1

[Transport]
Transport_on           =Yes
Concentration          =deska.con
Transport_BCD          =deska.tbc
Transport_out          =transport.pos
N_Substances           =1
subst_names           =h

[Constants]
g                      =9.81
rho                    =1000

```

Z výpisu řídicího souboru lze zjistit název úlohy. Je zde nastaven konec výpočtu simulace na 100 s, a k ukládání dochází desetkrát každou sekundu. V sekci Input jsou uvedeny názvy vstupních datových souborů. Zvoleným řešičem je Matlab. Výstupním souborem pro proudění je results.pos. V sekci Transport je zapnut výpočet transportu, a jsou uvedeny názvy vstupních datových souborů pro výpočet transportu. Výstupní soubor transportu je transport.pos. Je zde zvolen transport jedné substance. V sekci Constants je uvedeno gravitační zrychlení a poměrná hustota.

3.1.2 Vstupní datové soubory

Formát všech vstupních datových souborů je totožný. Nejprve je formální hlavička, poté počet jednotlivých položek daného typu v souboru a posléze samotná data.

Soubor s příponou **.msh** obsahuje souřadnice jednotlivých uzlů a seznam jednotlivých elementů. Formát bodů je ve tvaru: číslo bodu a je ho souřadnice x, y, z. V seznamu elementů je uvedeno číslo elementu a mezi kterými uzli leží. Pro správné

zobrazení spočtených výsledků je nutné zachovat správný směr zapsání uzlů pro každý element. Tento směr je levotočivý.

V souboru s příponou **.mtr** jsou uvedeny materiálové vlastnosti pro danou oblast. Je zde uvedeno číslo materiálu a koeficienty.

Soubor s příponou **.bcd** obsahuje údaje okrajových podmínek pro proudění. Je zde uvedeno číslo elementu, hodnota veličiny, strana elementu, na které se veličina vyskytuje a další koeficienty nutné pro výpočet.

Soubor s příponou **.ngh** je generován ze souboru **.msh** a obsahuje údaje sousedících elementů.

Tyto čtyři soubory je nutné zadat, je-li počítáno pouze proudění, tj. bez následného výpočtu transportu. Pro výpočet transportu je nutné zadat ještě další dva soubory.

Soubor s příponou **.con** obsahuje informace o počátečních koncentracích látek v jednotlivých elementech. Po formální hlavičce opět následuje počet koncentrací. Dále následují data ve formátu: číslo elementu a hodnota koncentrace (příp. koncentrací) v daném elementu.

V souboru s příponou **.tbc** jsou zadána data pro okrajové podmínky transportu. Okrajová podmínka pro transport musí být uvedena pro každé místo, ve kterém je uvedena okrajová podmínka pro proudění.

4 Nový program 123Flow

Do stávající verze programu bylo nutné zakomponovat nový parametr, který ovlivňuje proudění, a tímto parametrem je hustota. Jak bylo popsáno v kapitole 2.2.2 je hustota spočítána z počátečních koncentrací pro každý jednotlivý element a je pro výpočet umístěna ve středu elementu.

Zahrnutí hustoty do výpočtu si vyžádalo zavedení nových proměnných v řídicím **.ini** souboru, a nových funkcí ve vlastním kódu programu.

4.1 Nové vlastnosti a parametry

První nutnou změnou v programu je možnost rozhodnutí, zdali bude hustota zahrnuta jako výpočetní parametr. Pro toto rozhodnutí je vytvořena nová proměnná **problem->dens**, která je typu boolean. To znamená, že může nabývat pouze hodnot **Ano (True)** a **Ne (False)**. Pokud je zvolen výpočet proudění bez vlivu hustoty

volá se funkce z původního programu `Calc_sides_rhs`. Je-li však zvolen výpočet proudění s vlivem hustoty, dochází k volání nové funkce `Calc_sides_rhs_dens`. Je také nutné získat hustotu transportované kapaliny. Jak bylo uvedeno v sekci 2.2.2, je potřeba zjistit počáteční hustotu kapaliny. Tento účel splnila již implementovaná proměnná `rh0` v sekci `Constants` řídicího `.ini` souboru. Z ní je hodnota načtena do datové struktury `problem->rh0`. Výsledná hustota je poté výsledkem výpočtu z počáteční hustoty a koncentrace substance v jednotlivých elementech.

Další potřebnou změnou je zahrnutí transportu více substancí v proudící kapalině. Více substancí ovlivní proudění podle toho, jakou váhu přidělíme jednotlivým substancím. Tento problém byl vyřešen tvorbou nového pole koeficientů α , kterým je násobena koncentrace v každém jednotlivém elementu, při výpočtu sumy koncentrací. Počet α koeficientů je závislý na počtu substancí. Tyto koeficienty jsou načítány jako proměnná `con_params`.

4.2 Úpravy funkcí v programu

V řídicím `ini` souboru, v sekci `Global`, je vytvořena nová položka `Density_on`. Je typu řetězec, a právě z ní je načítána informace do proměnné `problem->dens`. Dle této informace dojde k rozhodnutí, které je umístěno ve funkci `Side_Calculation_mh` a následnému volání příslušné funkce, jenž se také nachází v souboru `Sides.c`.

```
if(problem->dens == YES)
    calc_side_rhs_dens( sde, problem, mesh);
else
    calc_side_rhs( sde );
```

Výpis části dopsaného kódu v nové funkci `calc_side_rhs_dens`, v tomto výpisu je implementován vzorec uvedený v kapitole 2.2:

```
val_con = dens_function_conc(ele, problem, mesh);
ele->rhs [ sde->lnum ] += (ele->centre[ 2 ] - ele ->
centre[ 2 ])*(1 + val_con / problem->rho);}
```

Proměnná `val_con` je výsledkem funkce, jenž v sobě zahrnuje transport více substancí. Kvůli posloupnosti výpočtů je však nutné nejprve vypočítat tuto hodnotu. Je spočítána ve funkci `dens_function_conc`, dle výpočtu uvedeného v kapitole 2.2.2.

Výpis části této funkce je:

```
val_con = 0.0;
for( si = 0; si < n_subst ; si++ ) {
    val_con += ele->start_conc->conc[si] * problem->
    con_params [si];
} return val_con;}
```

Tyto úpravy v sobě zahrnují potřebné změny, které jsou nutné pro správný výpočet proudění s vlivem hustoty. Jde o cyklus přes všechny transportované substance, kde proměnná `ele->start_conc->conc[si]` vyjadřuje hodnotu jejich koncentrace a proměnná `con_params [si]` hodnotu jejich α parametru, tedy jejich váhu. Výstupem této funkce je hodnota hustoty kapaliny pro každý element.

4.3 Nový řídicí ini soubor

Jak již bylo zmíněno, přibyla v sekci Global proměnná `Density_on`, přes kterou se zvolí zapnutí výpočtu proudění v závislosti na hustotě. Dále je zavedena proměnná `con_params`, která interpretuje α parametr pro jednotlivé substance.

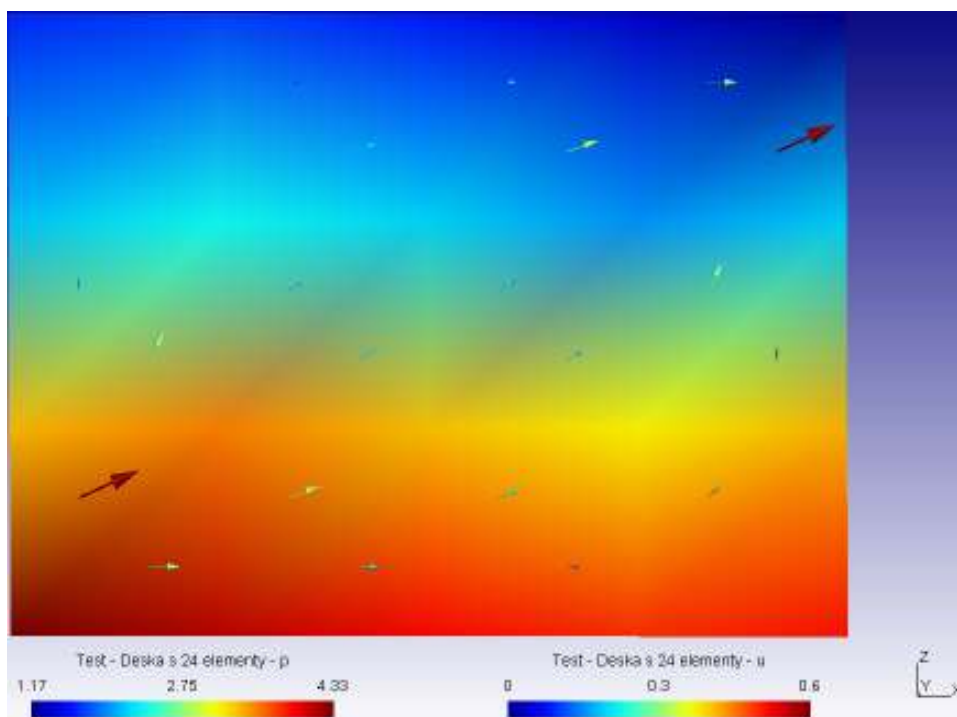
4.4 Výstupy programu

Po skončení výpočtu jsou výsledky zapsány do souborů s příponou `.pos`. Jeden soubor pro proudění a jeden pro transport, počítal-li se.

Pro vlastní zobrazení výsledků je použit program `Gmsh`. Výsledky mohou být tři, a to: proudové pole rychlostí, tlaky a transport substancí v průběhu času. Příklady výsledků jsou uvedeny níže. Tím, že pro zobrazení výsledků používáme další program, projevují se v nich nedostatky způsobené tímto programem. Tyto nedostatky jsou popsány u jednotlivých výsledků, tedy v místech, kde přímo ovlivňují zobrazený výsledek. Zároveň zde není vysvětleno ovládání programu `Gmsh`.

4.4.1 Proudové pole rychlostí a zobrazení tlaků

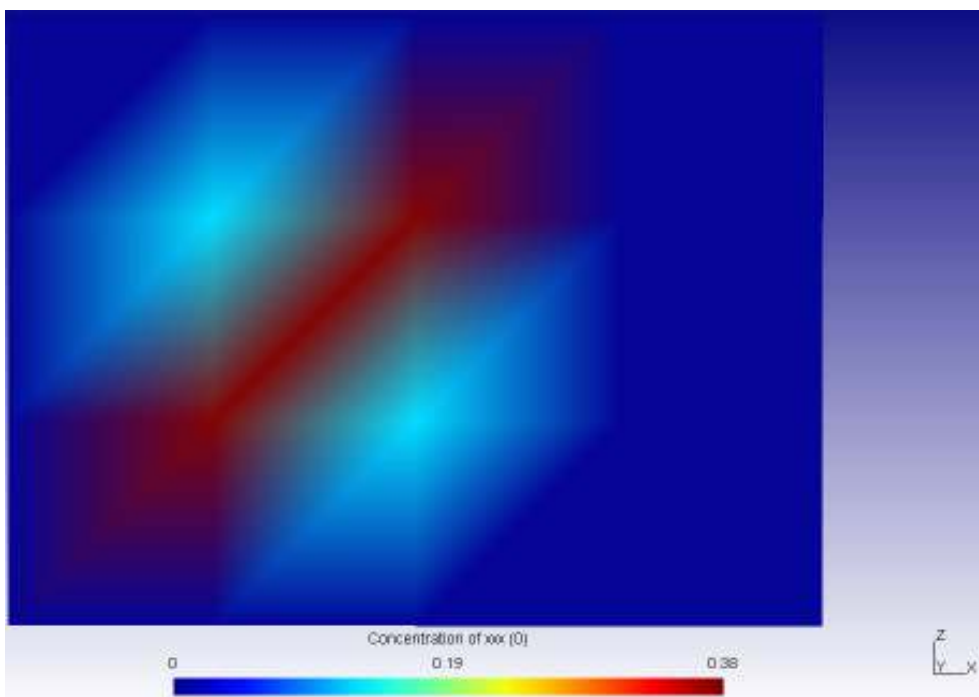
V tomto typu výsledku jsou zobrazeny vektory rychlosti proudění v jednotlivých místech modelované oblasti, jak je vidět na obrázku 8. Hodnota jednotlivých vektorů je odlišena nejen barvou, jejíž význam je uveden na stupnici pod modelovanou oblastí, ale také zobrazenou velikostí jednotlivých vektorů. Vektorové pole je umístěno na pozadí, jenž označuje hodnotu tlaku v jednotlivých místech. Stupnice pro zjištění hodnoty tlaku je opět uvedena pod zobrazením modelované oblasti.



Obrázek 8: Vektorové pole rychlostí.

4.4.2 Transport substance

Dalším zobrazením vypočtených výsledků může být transport obsažené substance v transportované látce v závislosti na čase, což je zobrazeno na obrázku 9.



Obrázek 9: Hodnota koncentrace v čase 0 s.

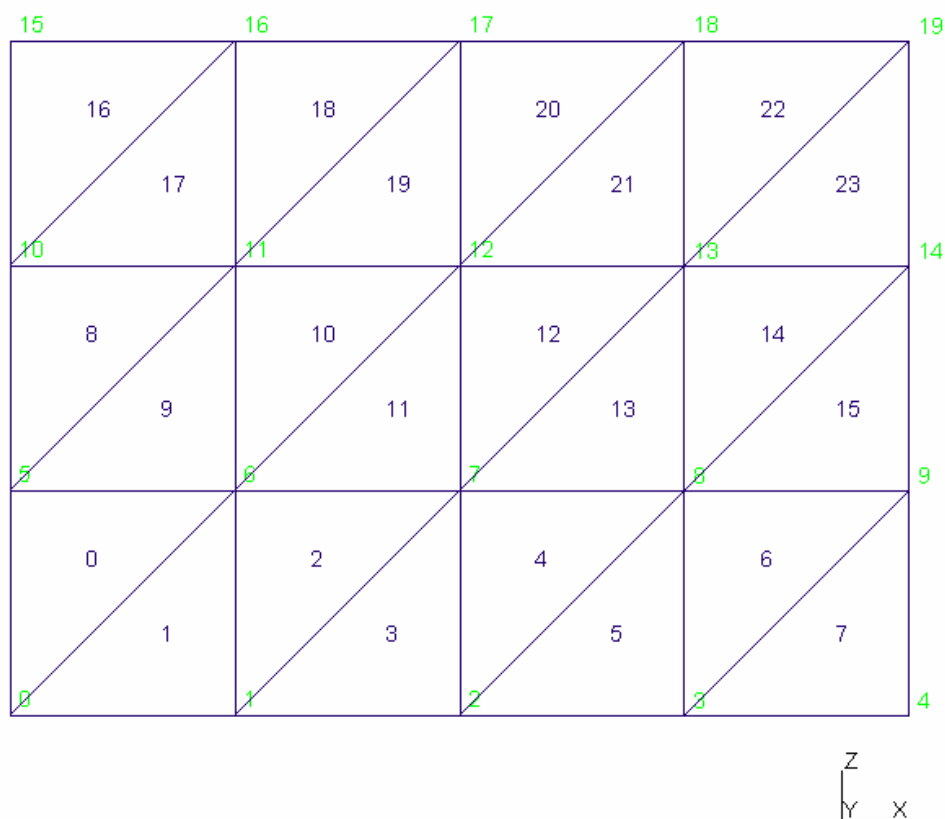
5 Testovací úlohy

Pro ověření vlastností nového programu 123Flow jsme definovali dvě testovací úlohy. Jsou navrženy tak, aby na nich bylo jednoznačně poznat, že proudění, a posléze i transport, jsou hustotou ovlivněny. Obě testovací úlohy jsou 2D zobrazení. Jde o svislé řezy testovacích úloh.

5.1 Deska 4x3 m bez pukliny

Tato deska má rozměry 4x3 m, což znamená, že je zde 12 čtvercových elementů. Ty jsou rozděleny ještě na polovinu, tento problém je diskutován v kapitole 2.4. Jedná se o úlohu bez pukliny. Daná úloha má své definované datové soubory, které jsou načítány do programu. Jak již bylo popsáno výše, jedná se o soubory zahrnující materiál desky, souřadnice uzlů, sousedy, okrajové podmínky proudění, údaje počátečních koncentrací a okrajové podmínky transportu.

Vlastní geometrie úlohy, ve které jsou zobrazeny čísla jednotlivých uzlů a čísla jednotlivých elementů, je zobrazena na obrázku 10.



Obrázek 10: Geometrie modelované oblasti desky s 24 elementy.

Každý element má také očíslovány jednotlivé stěny 0 – 2. Jsou očíslovány od hodnoty nejmenšího uzlu levotočivě.

5.1.1 Bez toku

Počáteční hodnoty koncentrací a okrajové podmínky jsou uvedeny v tabulce 1.

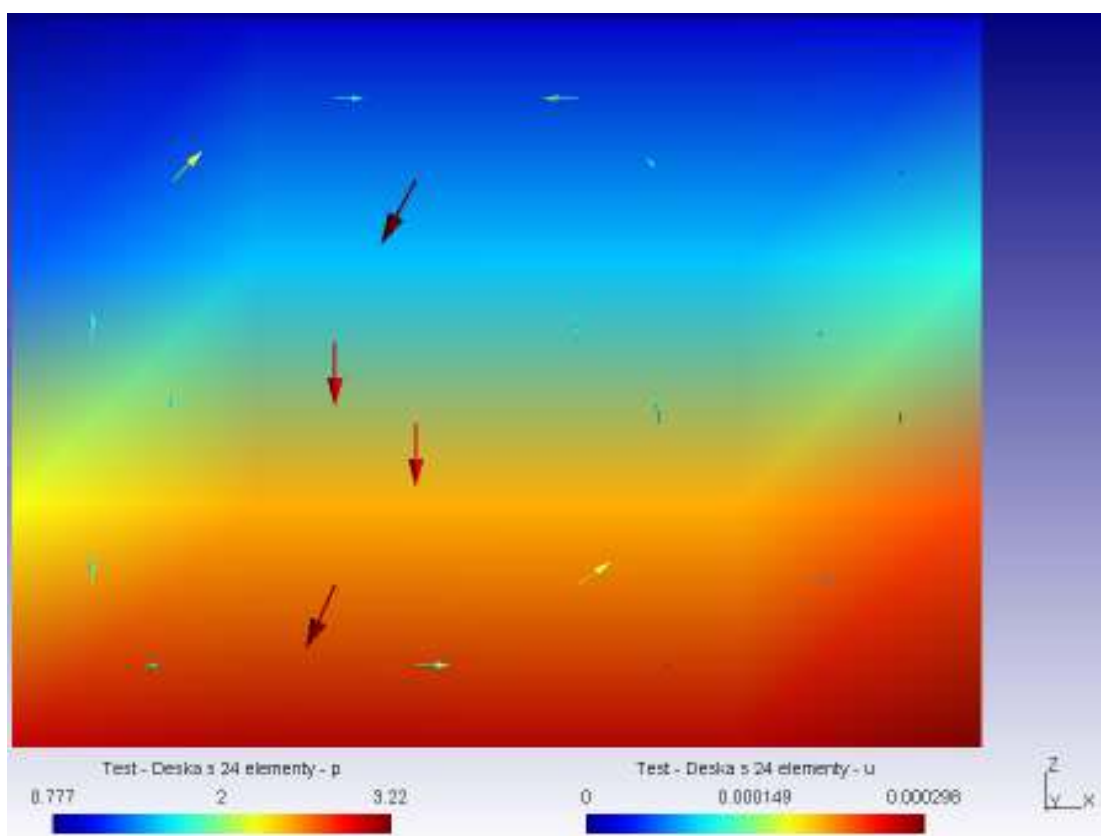
Hodnota tlaku p je uvedena v metrech vodního sloupce.

symbol	veličina	umístění	hodnota	jednotka
c	koncentrace	10. element	1	g/l
c	koncentrace	11. element	1	g/l
p	tlak	23. element, stěna 1	1	m
g	gravitační zrychlení	-	9,81	m/s ²
ρ	hustota roztoku	-	1000	kg/m ³
T	výpočetní čas	-	20000	s
Δt	ukládací kroky	-	200	s

Tabulka 1.

Jsou tedy zadány počáteční podmínky koncentrace. Ve všech ostatních elementech mimo uvedených je počáteční koncentrace nulová. Jelikož jde o variantu úlohy bez toku jsou definovány okrajové podmínky toku přes okraj modelované oblasti jako nulové.

Zhodnotíme-li výsledné vektorové pole rychlostí, na obrázku 11. , je zřejmé, že dochází ke vzniku proudění v místech s vyšší koncentrací směrem dolů, díky gravitačnímu zrychlení . V okolí se proudění navrácí zpět.

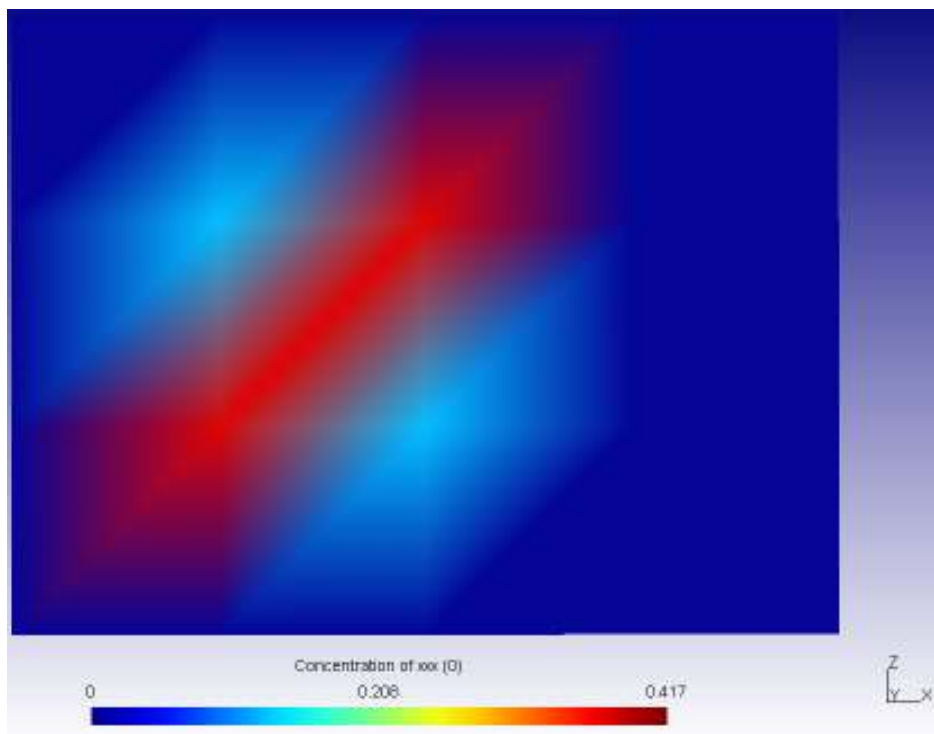


Obrázek 11: Proudové pole rychlostí, rozložení tlaků.

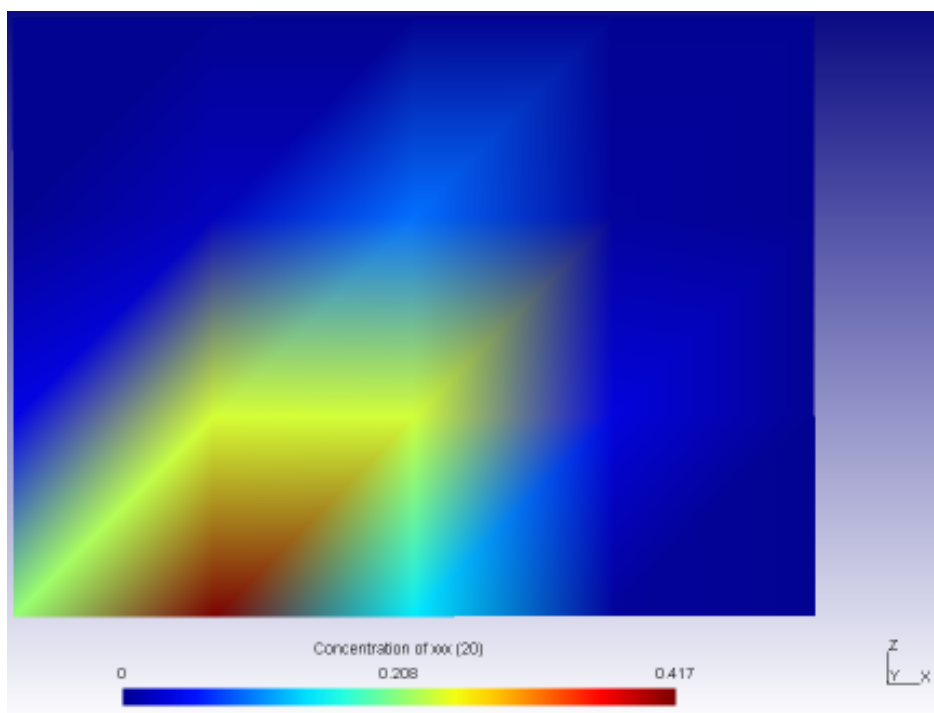
Umístění nenulových koncentrací do dvou vnitřních elementů nám umožnilo sledování celého vektorového pole rychlostí. Je patrné, že v místech s velkou koncentrací dochází k rychlému poklesu obsažené substance, a v jejím okolí k pomalému proudění kapaliny zpět, což fyzikálně zajišťuje rovnice bilance, 2.2.

Na obr. je zobrazeno rozložení koncentrací v nulovém čase. Přestože jsou zvoleny koncentrace pouze ve dvou elementech, je výsledný obrazec zobrazený programem Gmsh netransparentní. Je to způsobeno tím, že koncentrace zadaná do elementů je zobrazena ve vrcholech elementů, nikoli ve středech, ve kterých je

spočítána. Zároveň je vypočítána jako průměr hodnot koncentrací všech sousedících elementů. Aby bylo možné sledovat transport látky, je nutné nastavit delší výpočetní čas, a ukládání provádět po delších časových krocích.

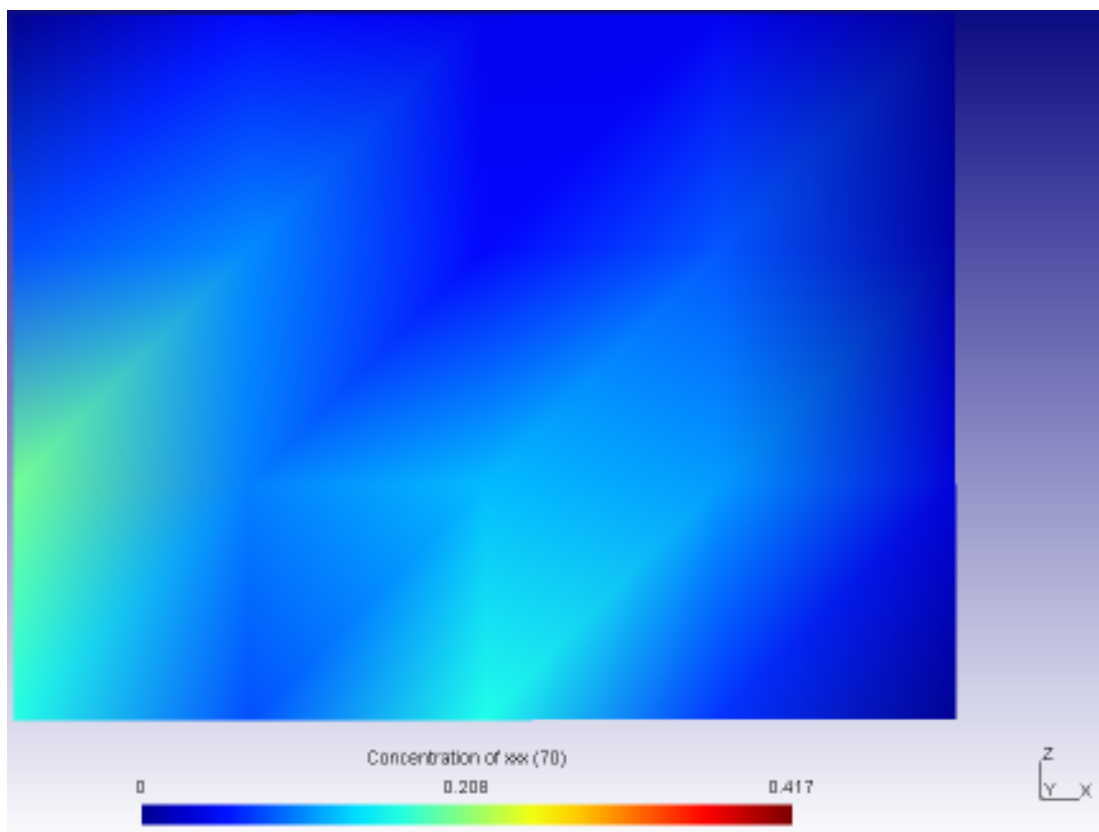


Obrázek 12: Počáteční rozložení koncentrací v čase 0.



Obrázek 13: Rozložení koncentrací po 1 hodině.

Na obrázku 13 je patrný pokles koncentrace podle původního rozložení rychlostí proudového pole. Jelikož není implementován princip nového výpočtu proudového pole z aktuálních hodnot koncentrací, tak zde popsany a zobrazený transport substancí neodpovídá realitě.



Obrázek 14. Rozložení koncentrací po 3,5 hodinách.

Na obrázku 14 je vidět postup koncentrace směrem nahoru, ale v daleko menší míře, než byla původní koncentrace. Kvůli nezahrnuté iterační smyčce tento výsledek neodpovídá skutečnosti, neboť v realitě by docházelo ke zvětšování koncentrace ve spodních rozích testované úlohy.

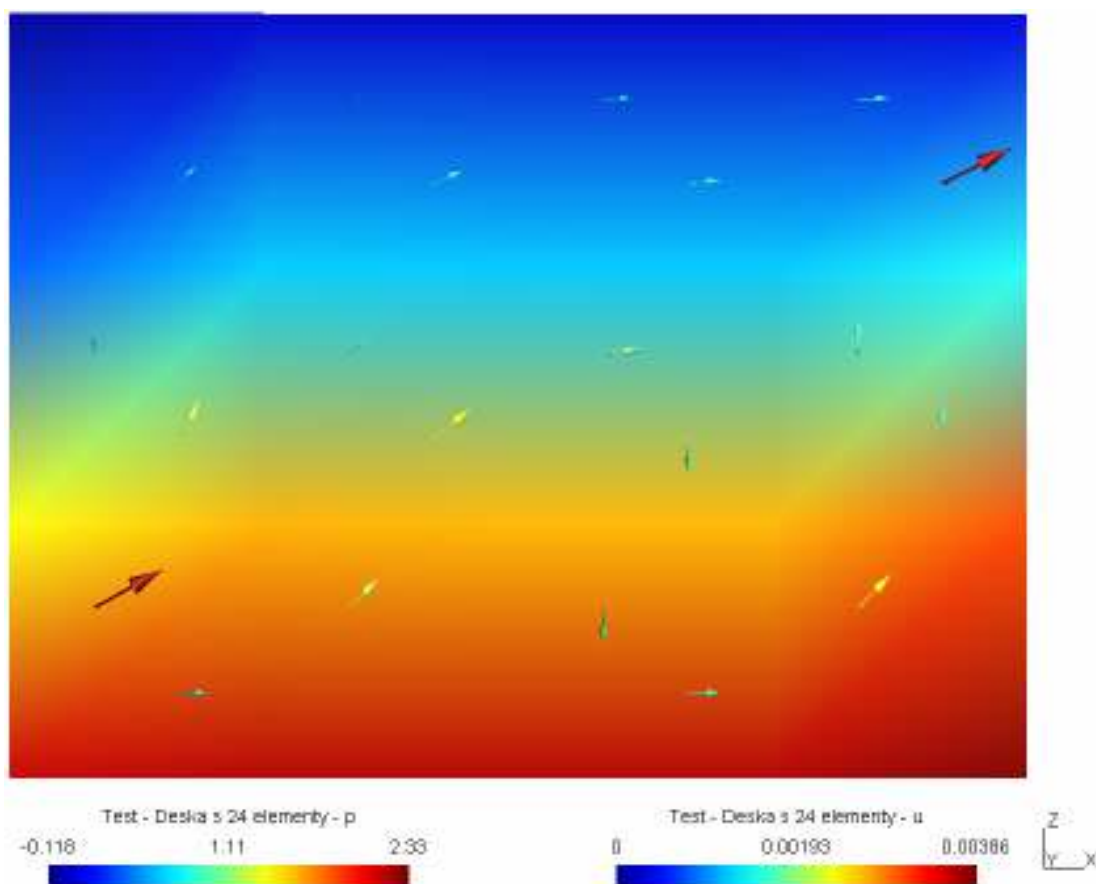
5.1.2 S tokem

Zahrneme-li však do okrajových podmínek různé hodnoty tlaků ve zvolených elementech, dojde ke vzniku proudění testovanou oblastí, a toto proudění bude zároveň ovlivněno koncentrací v určených elementech. Počáteční a okrajové podmínky jsou uvedeny v tabulce 2.

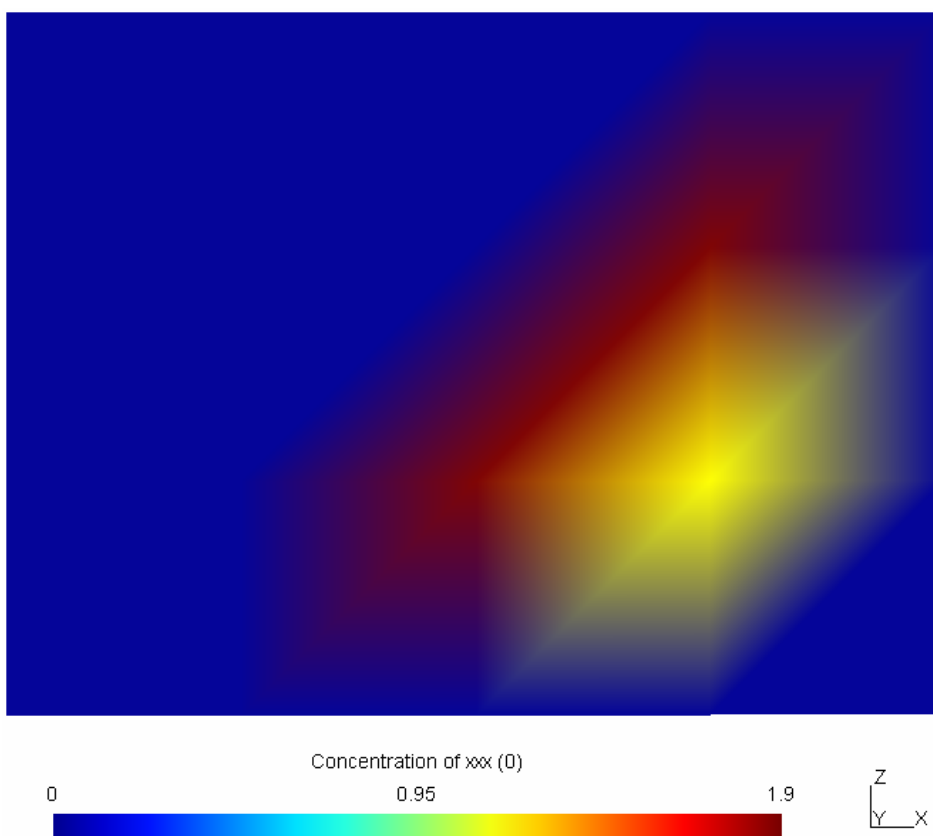
symbol	veličina	umístění	hodnota	jednotka
c	koncentrace	13.element	10	g/l
p	tlak	0.element, stěna 2	2,11	m
p	tlak	23.element, stěna 1	0,1	m
g	gravitační zrychlení	-	9,81	m/s ²
ρ	hustota roztoku	-	1000	kg/m ³
T	výpočetní čas	-	2000	s
Δt	ukládací kroky	-	10	s

Tabulka 2.

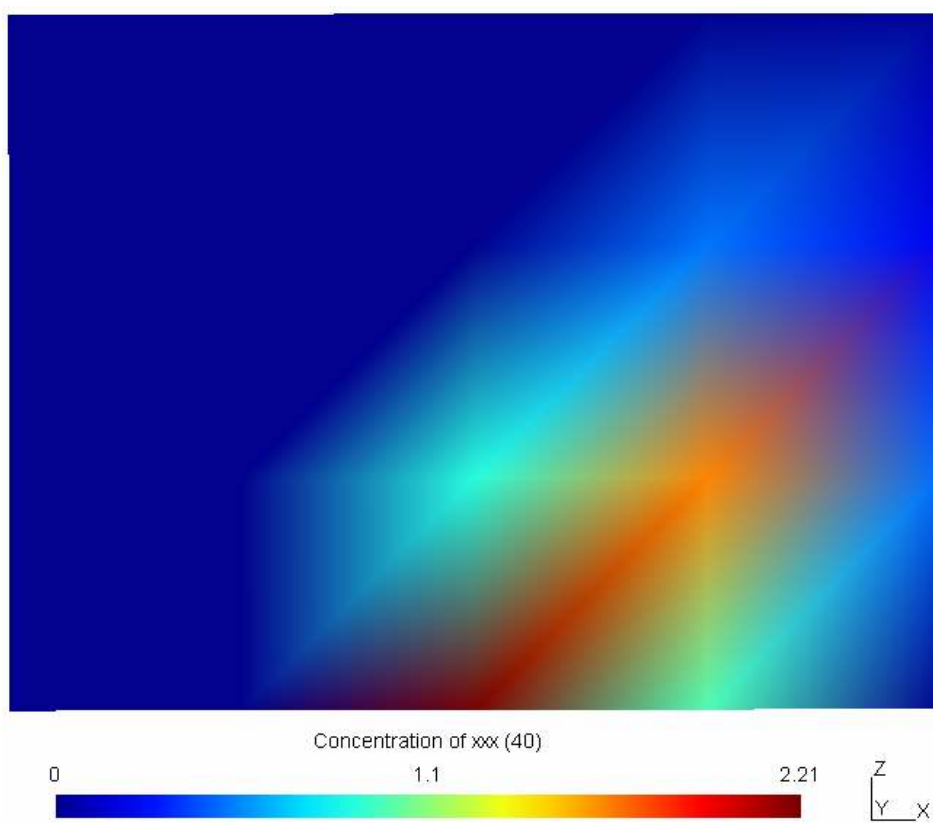
Výsledné proudové pole, obrázek 15, které má jako primární příčinu proudění gradient tlaků, je velmi výrazně ovlivněno koncentrací umístěnou do 13. elementu. Tato koncentrace potlačuje proudění vyvolané gradientem tlaků a zcela mění jeho směr ve směru působení gravitačního zrychlení.



Obrázek 15: Proudové pole s ovlivněním koncentrací.



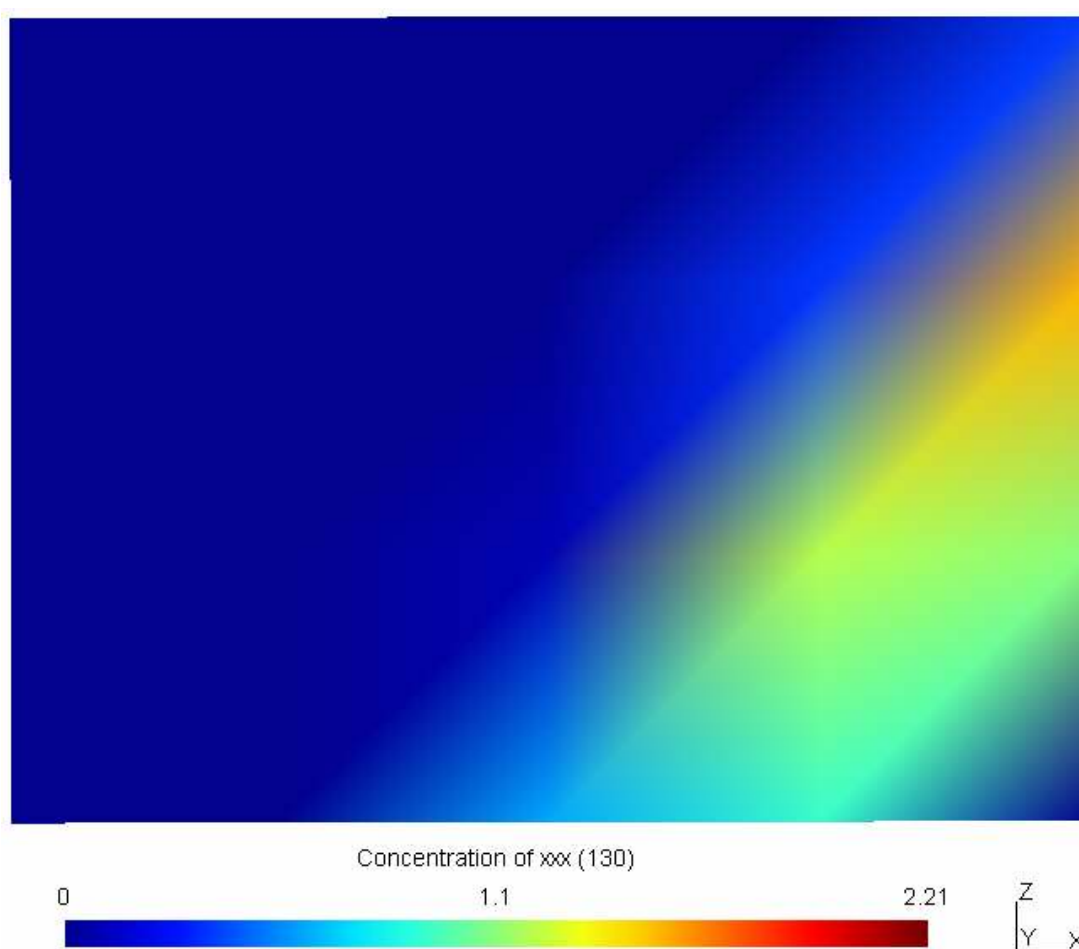
Obrázek 16: Rozložení počáteční koncentrace v čase 0 s.



Obrázek 17: Rozložení koncentrací v čase 6,6 min.

Rozložení koncentrací zobrazené na obrázku 17 reflektuje námi vypočtené proudové pole. Koncentrace umístěná do elementu 13. postupně klesá, a dochází ke snižování její hodnoty. Zároveň je také unášena okolním prouděním směrem k elementu, ve kterém je zadána okrajová podmínka malého tlaku.

Obrázek 18 znázorňuje rozložení koncentrací po 22 min. Je již zřejmé, že se původní koncentrace z elementu 13. rozšířila do okolí. Je také unášena prouděním směřujícím elementem 23 z modelované oblasti. Jelikož však není implementována iterační smyčka, je tento děj rychlejší, než by dle fyzikálních předpokladů měl být, a také nedochází ke zvyšování koncentrace v pravém dolním rohu modelované oblasti.



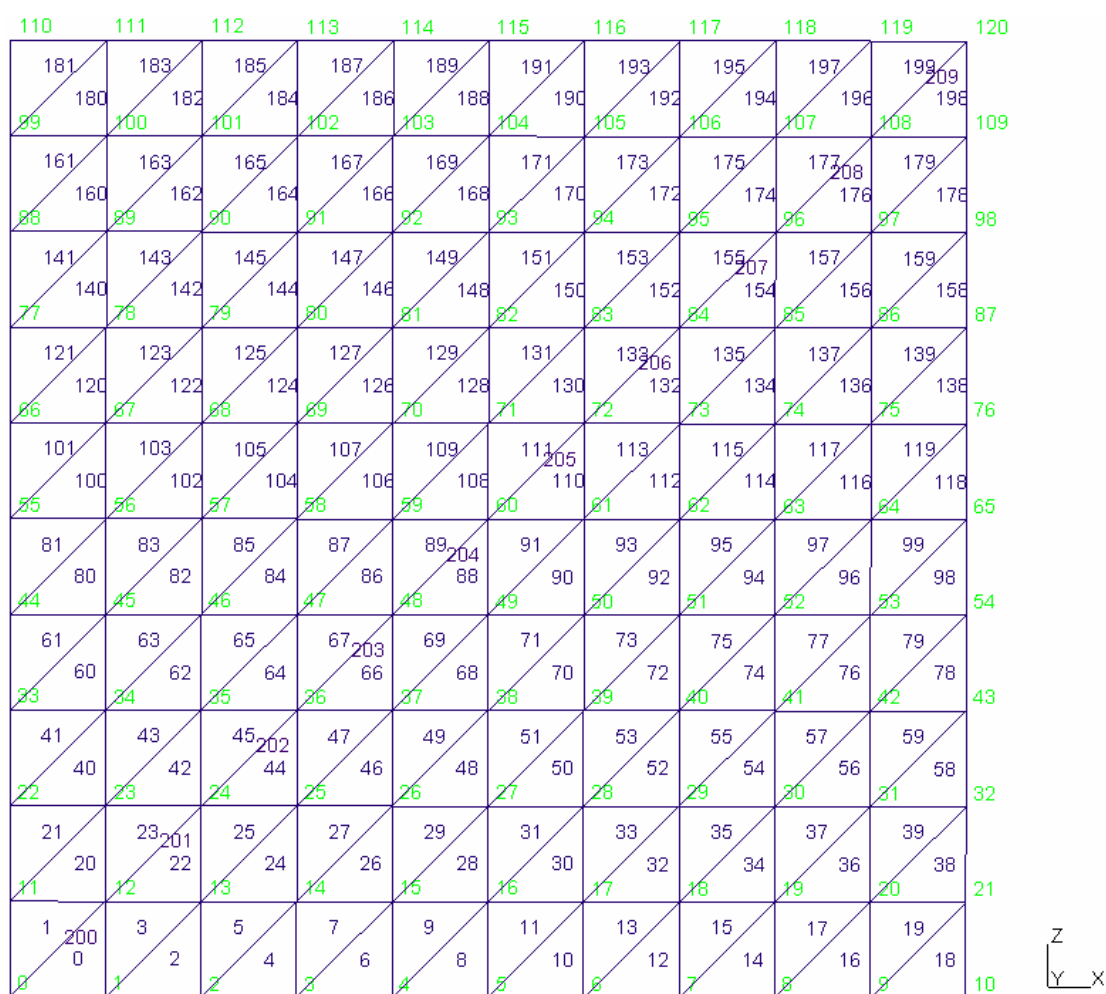
Obrázek 18: Rozložení koncentrací po 22 min.

Tato úloha demonstrovala změny a ovlivnění proudění nehomogenní hustotou proudící kapaliny. Modelovaná oblast byla navržena s malou hydraulickou vodivostí. Vypočtené údaje zcela nepopisují realitu, neboť nezahrnují jevy, jež nejsou součástí této práce.

5.2 Deska 10x10 m s puklinou na diagonále

Tato modelová úloha má rozměr 10x10 m, obsahuje 121 bodů a je aproximována 200 elementy. Je v ní zahrnuta puklina, což je 1D oblast s vysokou hydraulickou vodivostí. Proudění, a následný transport substance zde bude probíhat mnohem rychleji, než v okolních 2D elementech.

Oblast této testovací úlohy obsahuje 200 elementů (0 - 199), jenž aproximují prostředí s nízkou hydraulickou vodivostí a elementy 200 – 209 představující puklinu. Geometrie této úlohy je zobrazena na obrázku 19.



Obrázek 19: Geometrie úlohy s puklinou.

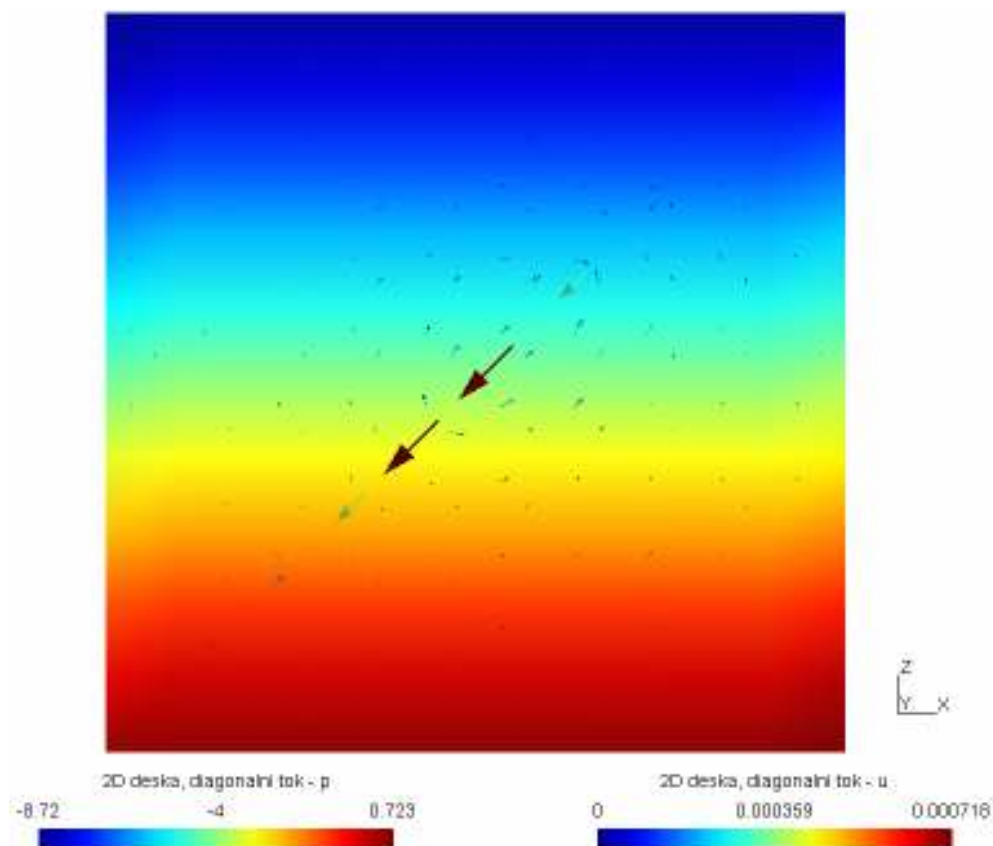
5.2.1 Bez toku

Zvolené výpočetní parametry, okrajové podmínky a konstanty jsou uvedeny v tabulce 3.

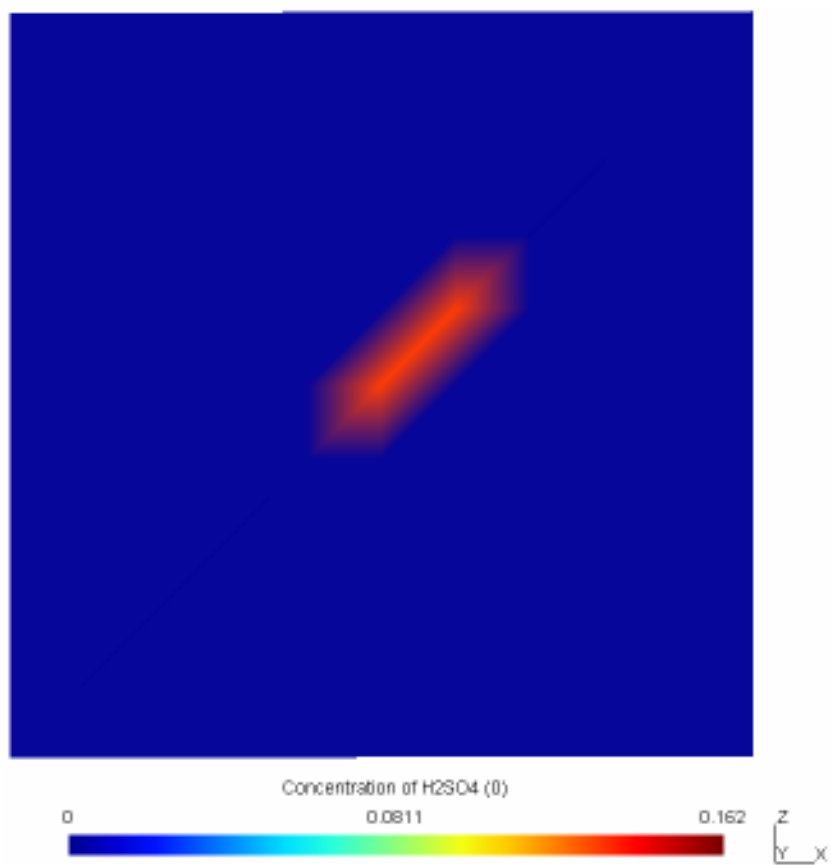
symbol	veličina	umístění	hodnota	jednotka
c	koncentrace	205.element	1	g/l
p	tlak	198.element, stěna 1	1	m
g	gravitační zrychlení	-	9,81	m/s ²
ρ	hustota roztoku	-	1000	kg/m ³
T	výpočetní čas	-	100000	s
Δt	ukládací kroky	-	500	s

Tabulka 3.

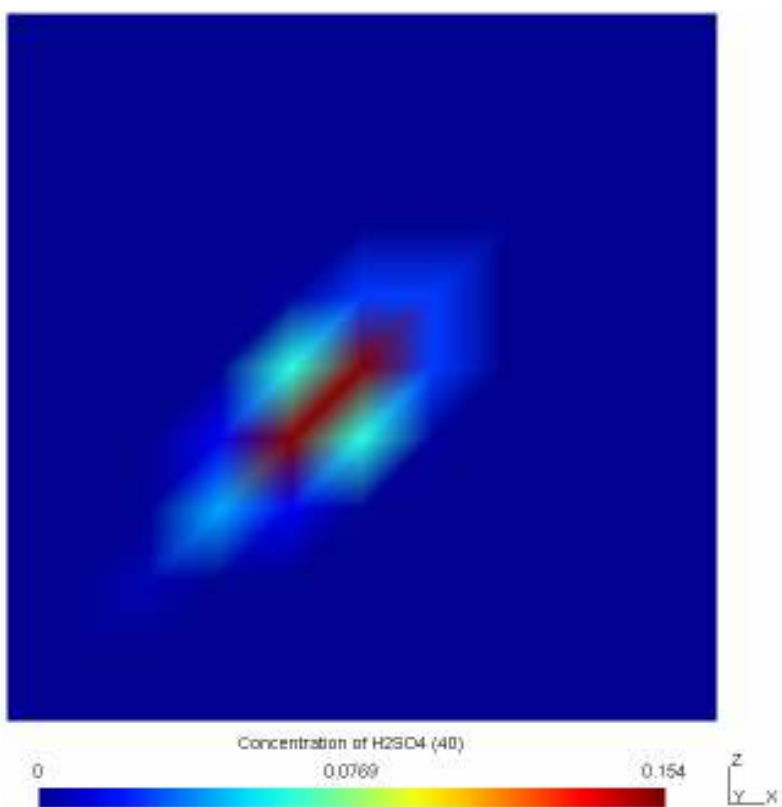
Umístění počáteční koncentrace přímo do pukliny, má za následek její mnohem rychlejší šíření, než jaké bylo demonstrováno v úloze bez pukliny, 5.1. Spočtené proudové pole jasně ukazuje toto rychlé proudění puklinou, zatímco v okolí dochází jen k nepoměrně menším prouděním, než v puklině. Výsledné proudové pole je zobrazeno na obrázku 20 .



Obrázek 20: Proudové pole uvnitř a vně pukliny.



Obrázek 21: Rozložení koncentrace v čase 0 s.



Obrázek 22: Rozložení koncentrace v čase 34 min.

Na obrázku 22 je zobrazeno rozložení koncentrace po 34 min transportu. Jak již bylo uvedeno dříve u úlohy bez pukliny, 5.1, je transport ovlivněn tím, že není implementována iterační smyčka v programu. Dochází tedy k šíření substance podle původního proudového pole, a tím k šíření do okolí. V modelu, kde by tyto smyčka byla implementována, by docházelo k mnohem menšímu šíření této substance do okolí a rychlejšímu posunu substance puklinou.

5.2.2 S tokem

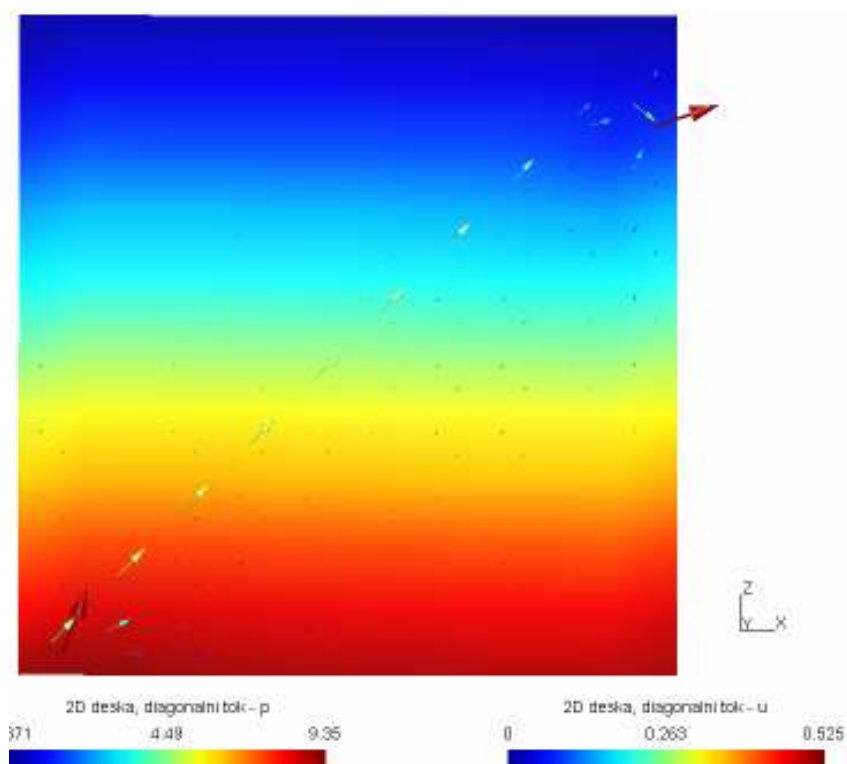
Rozšíříme-li modelovanou úlohu o nové okrajové podmínky, vzniká proudění, které je ovlivněno nejen koncentrací substance v puklině, ale hlavně samotnou puklinou. Zadané parametry jsou uvedeny v tabulce 4.

symbol	veličina	umístění	hodnota	jednotka
c	koncentrace	205.element	1	g/l
p	tlak	178.element	0,2	m
p	tlak	0.element	10,1	m
g	gravitační zrychlení	-	9,81	m/s ²
ρ	hustota roztoku	-	1000	kg/m ³
T	výpočetní čas	-	200	s
Δt	ukládací kroky	-	0,5	s

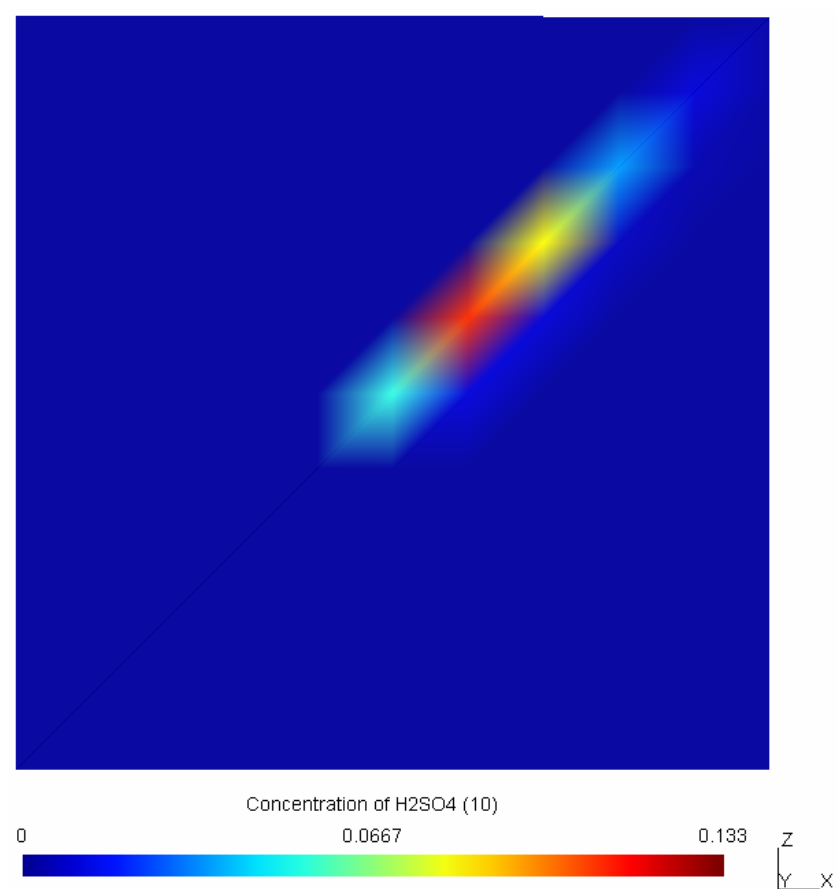
Tabulka 4.

Výsledné proudové pole, které je zobrazeno na obrázku 23. , ukazuje, že proudové pole je ovlivněno hustotou jen minimálně. Program Gmsh toto ovlivnění nevykreslí, protože je v porovnání s ostatními vektory nepatrné. Naproti tomu puklina toto proudění ovlivňuje mnohem více. Je vidět, že větší část proudění je realizována přes puklinu, a proudění v okolí je velmi malé, přesto nezanedbatelné, neboť působí přes značnou plochu, oproti puklině.

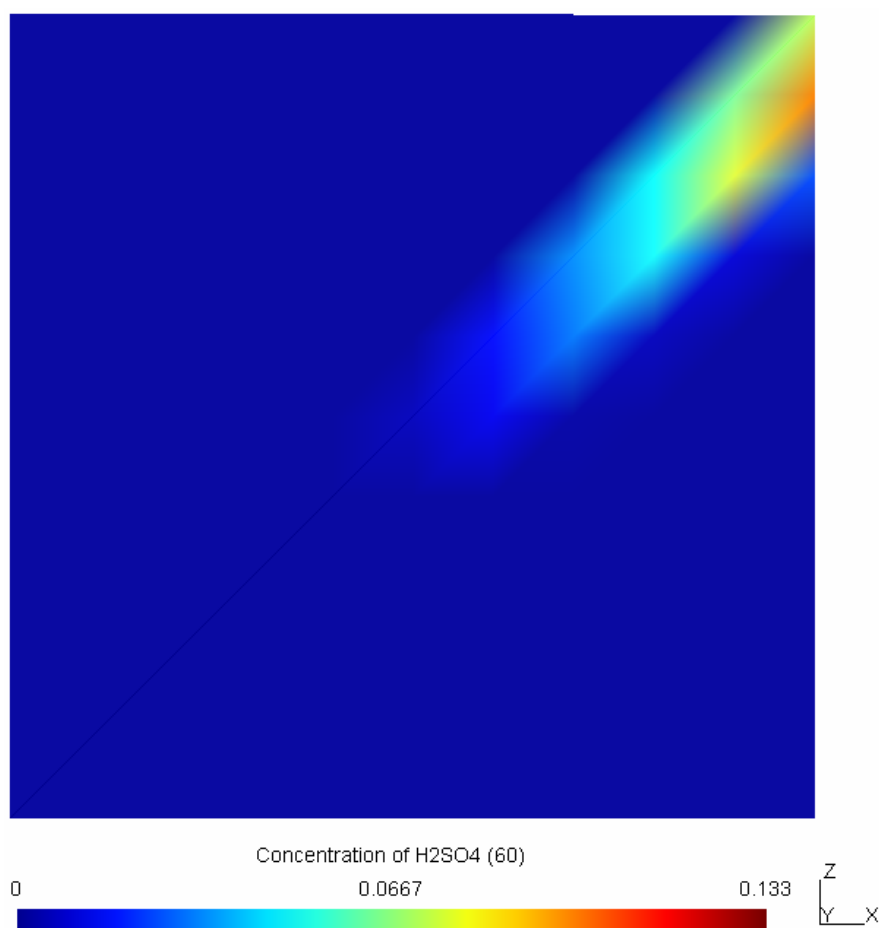
Počáteční rozložení koncentrace je naprosto stejné jako v případě pukliny bez vtoku [32]. Transport v čase 5 s, obrázek 24, ukazuje, že dochází k posunu koncentrace puklinou směrem k elementu, kde je výtok z modelované oblasti.



Obrázek 23: Proudové pole ovlivněné puklinou.



Obrázek 24: Transport puklinou v čase 5 s.



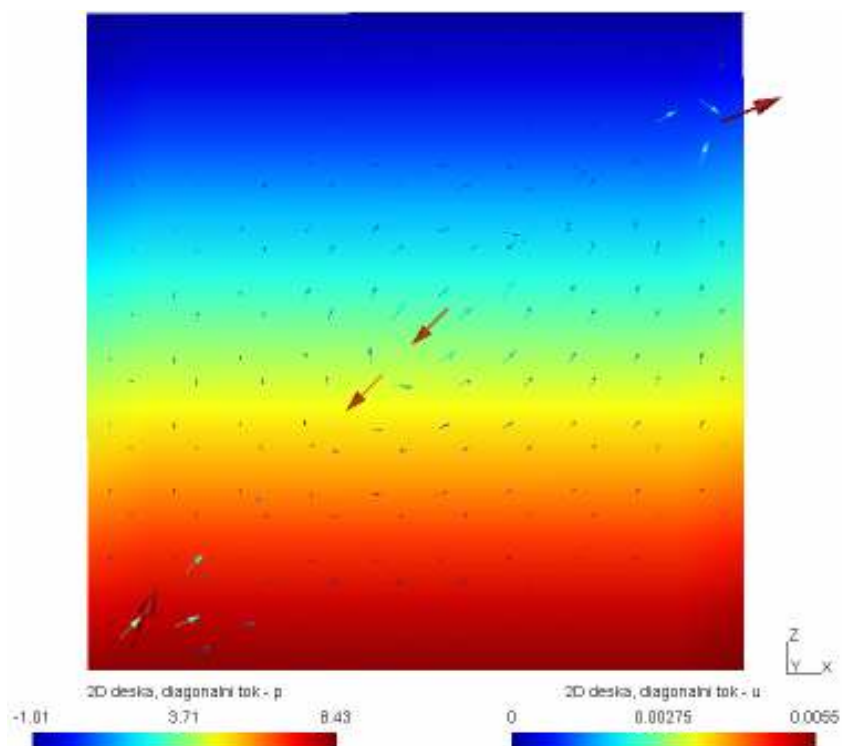
Obrázek 25: Transport substance v čase 30 s.

Na této úloze jsme demonstrovali, jak je proudění ovlivněno puklinou, která se vyskytuje v modelované oblasti. Z vypočtených výsledků lze odvodit, že vliv pukliny na proudění vody a následný transport substance, je mnohem větší, než vliv hustoty na toto proudění.

Provedeme-li však změnu parametrů úlohy tak, jak je uvedeno tabulce 5, vliv hustoty na proudění se zvětší, a naopak vliv pukliny se zmenší.

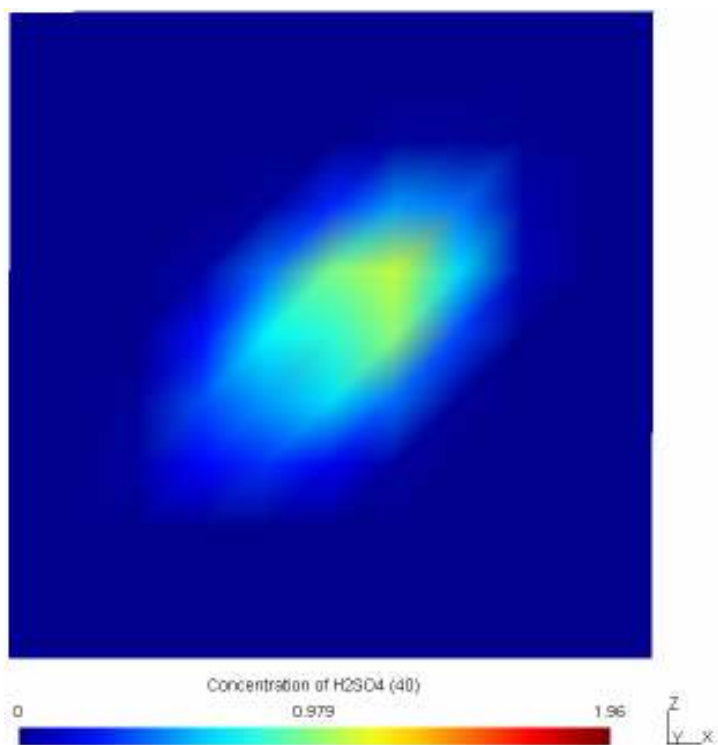
symbol	veličina	umístění	hodnota	jednotka
c	koncentrace	205.element	10	g/l
p	tlak	178.element	0,2	m
p	tlak	0.element	8,72	m
g	gravitační zrychlení	-	9,81	m/s ²
ρ	hustota roztoku	-	1000	kg/m ³
T	výpočetní čas	-	15000	s
Δt	ukládací kroky	-	50	s

Tabulka 5

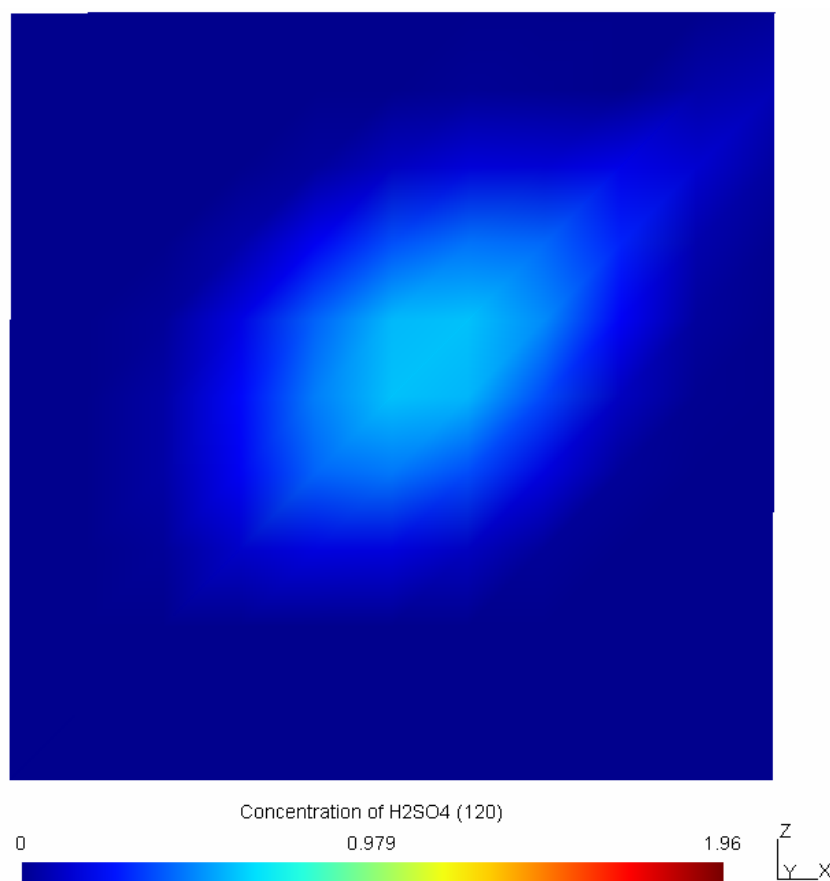


Obrázek 26: Proudové pole s převážením vlivu hustoty.

Výsledné proudové pole, obrázek 26, zobrazuje vliv koncentrace v puklině na proudění. Lze pozorovat, že tento vliv již není zanedbatelný. V puklině dochází k proudění opačným směrem, než je proudění vyvolané rozdílnými tlaky, vzniká vír.



Obrázek 27: Transport substance v čase 34 min.



Obrázek 28: Transport substance v čase 2 hod.

Obrázky 27, 28 zobrazují transport substance dle vypočteného proudového pole, obrázek 26. Je zřejmé, že dochází k transportu substance z pukliny do okolí, a jejímu neustálému rozšiřování. Vlivem víru je také transport substance velmi pomalý. Oblast „se vyčistí“ až za 5,5 hod.

6) Závěr

Původní program 123Flow, který počítal proudění a konvektivní složku transportu byl rozšířen o vliv hustoty na proudění. Začlenění této nové vlastnosti do programu si vyžádalo úpravu vstupních parametrů a příslušných datových struktur. Úprava výstupních parametrů nebyla nutná. Do programu však nebyla začleněna iterační smyčka, která by přepočítávala proudové pole, dle nového rozložení koncentrací. Toto rozložení koncentrací by vycházelo vždy z prvního kroku vypočteného v transportu, zároveň by docházelo k ukládání těchto rozložení koncentrací. Výsledkem by bylo proudové pole, které by se vyvíjelo v čase. Vypočtené údaje v transportu by tak daleko věrněji reprezentovali realitu. Abychom

ověřili model i bez této iterační smyčky byly vytvořeny dvě testovací úlohy. První úloha pro ověření vzniku proudění pouze vlivem rozdílné hustoty. Druhá úloha pro ověření modelu proudění v oblasti s puklinou. Výsledky z těchto úloh odpovídají očekávaným výsledkům, vzhledem k míře zahrnutých reálných jevů.

Seznam literatury:

- [1] O. Kolditz, H.J.G. Diersch: Variable-density flow and transport in porous media: approaches and challenges, Advanced in Water Resources, Vol. 25, pp.899-944,2002
- [2] Bear J., Tang C.-F., De Marsily G.: Modelling Flow and Contaminant Transport in Fractured Rocks, USA: Academic Press, Inc., 1993.
- [3] M. Hokr: Transportní procesy, skripta TUL, PDF soubor, 2003
- [4] Dokumentace k programu Flow123D
- [5] J. Havlíček: Modelování transportu látky v puklinovém prostředí s imobilní zónou, diplomová práce TUL, PDF soubor, 2006
- [6] M. Řezníček: Vývoj modelu transportu látek s nehomogenním rozložením hustoty kontaminace, diplomová práce TUL, PDF soubor, 2003
- [7] www.markelowitz.com
- [8] www.tech.plym.ac.uk

Seznam obrázků:

1	Hornina – nehomogenní porézní prostředí bez výrazných puklin	9
2	Puklinová struktura v hornině	10
3	Obecná funkce pro výpočet hustoty $\rho = f(c)$	14
4	Obecná oblast s puklinou a počáteční koncentrací v čase 0 s.	15
5	Obecná oblast v čase $t + \Delta t$	15
6	Aproximační elementy	16
7	Řez 3D oblastí s puklinou	16
8	Vektorové pole rychlostí	23
9	Hodnota koncentrace v čase 0 s.	24
10	Geometrie modelované oblasti desky s 24 elementy.	25

11 Proudové pole rychlostí, rozložení tlaků.	26
12 Počáteční rozložení koncentrací v čase 0.	27
13 Rozložení koncentrací po 1 hodině.	27
14 Rozložení koncentrací po 3,5 hodinách.	28
15 Proudové pole s ovlivněním koncentrací.	29
16 Rozložení počáteční koncentrace v čase 0 s.	30
17 Rozložení koncentrací v čase 6,6 min.	30
18 Rozložení koncentrací po 22 min.	31
19 Geometrie úlohy s puklinou.	32
20 Proudové pole uvnitř a vně pukliny.	33
21 Rozložení koncentrace v čase 0 s.	34
22 Rozložení koncentrace v čase 34 min.	34
23 Proudové pole ovlivněné puklinou.	36
24 Transport puklinou v čase 5 s.	36
25 Transport substance v čase 30 s.	37
26 Proudové pole s převážením vlivu hustoty.	38
27 Transport substance v čase 34 min.	38
28 Transport substance v čase 2 hod.	39

Seznam příloh:

Příložené CD obsahuje:

- Elektronickou verzi této práce Bakalarska_prace.pdf, Bakalarska_prace.doc
- Geometrii testovacích úloh
- Spustitelný soubor